

**ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ
РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ
ВИНИЛОВЫХ МОНОМЕРОВ**

Полимеры, синтезированные методом цепной полимеризации, широко используются во многих сферах деятельности человека. Теоретическим и практическим аспектам реализации этого типа полимеризации посвящено немало научных трудов. При этом наиболее эффективным приемом модификации свойств высокомолекулярных соединений без сомнения является сополимеризация двух и большего количества сомономеров. Это связано с тем, что гомополимеры как правило не удовлетворяют всему спектру необходимых требований. В тоже время, экспериментальная практика показала, что реакционная способность мономеров в реакциях сополимеризации существенно отличается от значений этого показателя при гомополимеризации. Прогнозирование реакционной способности мономеров чрезвычайно важно для направленного регулирования свойств различных материалов на их основе полимеров.

Хорошо известно – почему и как строение мономеров влияет на их свойства и реакционную способность [1-2]. Но надо признать, что по настоящее время не существует эффективных теоретических подходов к априорному анализу относительной реакционной способности виниловых мономеров в процессах сополимеризации. Надежно этот показатель для каждого отдельного сочетания мономеров можно определить только экспериментально. Имеющиеся полуэмпирические методы также основываются на экспериментальных данных и зачастую дают неверный результат.

В тоже время, уже несколько десятилетий совершенствуются различные методы и программные средства, в которых они реализованы, для анализа геометрии, электронной структуры и термодинамических функции не очень сложных по строению соединений в состоянии газа. Очень активно для этого используются квантово-химические расчеты. Основной задачей квантовой химии является решение уравнения Шредингера и его релятивистского варианта уравнения Дирака для атомов и молекул. Уравнение Шредингера решается аналитически, учитывая следующие ограничения: жёсткий ротатор, гармонический осциллятор, одноэлектронная система. В настоящее время методами квантовой химии можно делать достаточно надежные расчеты лишь для молекулярных систем с числом атомов до одной-двух сотен,

да и то без учета межмолекулярного взаимодействия [3-4]. Этого явно недостаточно для предсказания коллективных свойств или характеристик даже отдельно взятых макромолекул.

Реальные многоатомные системы содержат большое количество взаимодействующих электронов, и, по всей видимости, аналитического решения этих основных уравнений не будет найдено в ближайшем будущем. Поэтому исследователям приходится искать приближённые, обычно численные или получисленные решения. Расчеты для высокомолекулярных соединений к тому же чрезвычайно усложняются хотя бы по причине стремящегося к бесконечности значения их конформационной энтропии. Также следует иметь в виду, что в реальности макромолекулы всегда находятся во взаимодействии с другими молекулами. И это окружение также необходимо принимать во внимание так, как только в кооперации отдельные макромолекулы определяют свойства полимерных материалов [5].

Быстрый рост сложности поиска решений методами квантовой химии с ростом сложности системы, а также предельные возможности современной вычислительной техники, сильно ограничивают применимость прикладной квантовой химии для анализа высокомолекулярных систем. Однако, использование методов компьютерного моделирования часто предоставляет единственную возможность получения на «молекулярном» уровне детальных сведений о структуре и свойствах макромолекул.

На основе проведенного анализа необходимо подчеркнуть, что имеющееся сегодня для молекулярного моделирования свойств веществ программные средства не предлагают конечного решения, а лишь являются набором методов, подходов и апробированных алгоритмов для выполнения вычислительного эксперимента. Поэтому правильность проведения и результаты этого эксперимента находятся «в руках» эрудиции и научного прозрения исследователя.

На начальном этапе вычислительных экспериментов по поиску критериев для априорного анализа относительной реакционной способности мономеров в реакциях цепной полимеризации, по-видимому, следует ограничиться исследованием моделей структуры исходных мономеров, структуры нескольких концевых мономерных звеньев растущих макрорадикалов и влиянием на нее окружения из свободных мономеров и других факторов реакционной среды. Только после этого может быть проведен корреляционный анализ между отдельными расчетными параметрами и экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1 Аскадский А.А., Кондращенко В.Н. Компьютерное материаловедение полимеров. – М.: Научный мир, 1999, 543 с.

2 Щербина Л.А., Геллер Б.Э., Геллер А.А. Априорная оценка некоторых физико-химических свойств пленко- и волокнообразующих полимеров. –Могилев: УО "МГУП", 2008. – 136 с.

3 Мак-Вини Р., Сатклиф Б. Квантовая механика молекул. – М.: Мир, 1972. – 380 с.

4 Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. – М.: Мир, 1972. – 590 с.

5 Askadskii A. A. Computational Materials Science of Polymers. – Cambridge International Science Publishers: 2003. – 696 p.

УДК 678.027

Д. С. Гончарёнок, магистрант; Е. И. Кордикова доц., канд. техн. наук;

А. В. Спиглазов, доц., канд. техн. наук (БГТУ, г. Минск)

ГИБРИДНЫЕ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ТЕРМОРЕАКТИВНЫХ СВЯЗУЮЩИХ В СТРОИТЕЛЬСТВЕ

В настоящее время на мировом рынке наблюдается увеличение объемов применения полимерных композиционных материалов (ПКМ) в строительной индустрии. Применение ПКМ в строительстве позволяет уменьшить массу строительных конструкций, повысить коррозионную стойкость и стойкость к воздействию неблагоприятных климатических факторов, продлить межремонтные сроки, выполнять ремонт и усиление конструкций с минимальными затратами ресурсов и времени [1]. Основными областями применения ПКМ в строительстве являются: арматура и гибкие связи, ограждения, сэндвич-панели, элементы мостовых конструкций.

В настоящее время все более важным становится сокращение стоимости изготовления и технического обслуживания композитных конструкций. Решение этой задачи заключается в сочетании новых концепций проектирования конструкций из ПКМ и экономичных методов их производства.

Одним из таких относительно новых методов является технология вакуумной инфузии, которая позволяет комбинировать различные виды армирующих материалов для создания гибридных структур и тем самым повысить эффективность использования композиционных материалов в нагруженных элементах конструкций строительного назначения. В качестве непрерывного волокнистого армирующего наполнителя применяют стеклоткани различного типа, а в качестве полимерной матрицы – полиэфирные, эпоксидные и винилэфирные смолы.

В реализованных до настоящего времени промышленных вариантах технологии вакуумной инфузии используется ограниченное количество наполнителей без учета эффективного использования вари-